

СТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ПРИ СТЕКЛОВАНИИ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

СПЛАВА $\text{Fe}_{83}\text{B}_{17}$

Дейч Д.Б.

Руководитель – проф., д.ф.-м.н. Косилов А.Т.

Воронежский государственный технический университет

ddeich@mail.ru

Построение и анализ моделей структуры аморфных сплавов, на сегодняшний день, является наиболее эффективным подходом для изучения организации атомных конфигураций в металлических стеклах. Для бинарных систем типа переходный металл-металлоид, основой для создания структурных моделей послужила концепция композиционного (химического) ближнего порядка, впервые предложенная в работе [1].

В настоящей работе проведено молекулярно – динамическое моделирование процесса стеклования сплава $\text{Fe}_{83}\text{B}_{17}$ в условиях охлаждения из жидкого состояния со скоростью $4,4 \times 10^{12}$ К/с. Выявлены структурные элементы, стабилизирующие аморфную фазу, а также изучена их эволюция и структурная организация в процессе закалки.

Молекулярно-динамическая модель расплава $\text{Fe}_{83}\text{B}_{17}$ содержащая 100000 частиц была построена при $T = 2300$ К с плотностью 7380 кг/м^3 .

Взаимодействие пар Fe-Fe, Fe-B, B-B описывали с помощью эмпирических парных потенциалов взаимодействия [3].

Циклическая процедура закалки со скоростью $4,4 \times 10^{12}$ К/с в изохорических условиях, сводилась к ступенчатому понижению температуры на $\Delta T = 20$ К с выдержкой при каждой температуре в течение $4,569 \times 10^{-12}$ с. После каждого цикла систему методом статической релаксации переводили в состояние с $T = 0$ К, предоставляя возможность атомам занять равновесные положения в локальных потенциальных ямах. Для статически релаксированных моделей рассчитывались потенциальная энергия (U_0), произведение давления на объем (P_0V) и проводился структурный анализ. Такая процедура позволяла определять степень структурной релаксации модели с понижением температуры.

Как видно из рисунка 1, в процессе охлаждения на температурных зависимостях U_0 и P_0V вблизи температуры 1300 К наблюдается точка перегиба, о чем свидетельствуют максимумы первых производных от указанных термодинамических величин.

В работе [4] в рамках метода молекулярной динамики на модели сплава Ag-Ni было показано, что определяющую роль в стабилизации аморфного состояния в процессе закалки играет увеличение доли икосаэдров, имеющих минимальный свободный объем из всех координационных многогранников железа и в то же время несовместимых

с трансляционной симметрией.

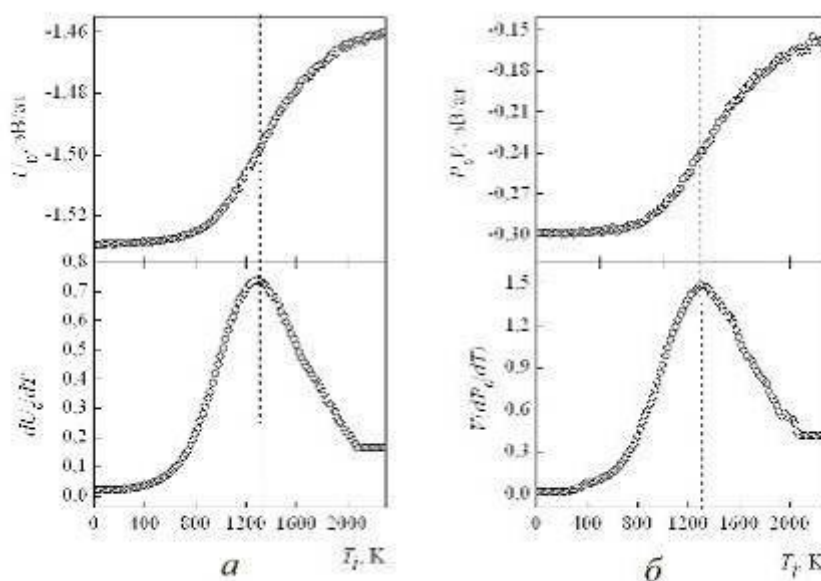


Рисунок 1. Температурные зависимости термодинамических функций статически релаксированных моделей и их производных (*а* – потенциальная энергия, *б* – произведение давления на объем)

В настоящей работе для выявления основных структурных единиц, стабилизирующих аморфную фазу исследуемой модели сплава, были проведены статистико-геометрический (на основе построения многогранников Вороного (МВ)) и кластерный анализ. Среди полиэдров, построенных на атомах металлоида, доминирующим и наиболее компактным в системе оказался МВ (0-3-6-0), представляющий собой искаженную антипризму Архимеда, накрытую двумя полуоктаэдрами. Для атомов, имеющих указанную локальную координацию, был проведен кластерный анализ результаты которого проиллюстрированы на рисунке 2. На рисунке 2,*а* представлена парная функция радиального распределения $g_{II}(r)$ атомов бора, находящихся в центрах координационных многогранников типа (0-3-6-0). Поскольку для атомов металлоида применен чисто отталкивательный потенциал их контакты в первой координационной сфере маловероятны, поэтому первый максимум ПФРРА слабо выражен. На рисунке 2,*б* приведены зависимости размера наибольшего кластера, состоящего из координационных многогранников типа (0-3-6-0) с расстояниями между соседями меньшими, либо равными r , от величины r при температурах «окружающей среды» 2300, 1500, 1300, 1200, и 0 К. Как видно на рисунке 2,*б*, при $T_i > 1280$ К порог перколяции наблюдается правее штриховой вертикальной линии, разделяющей область контактирующих от области не контактирующих между собой координационных многогранников. Следовательно, при $T_i > 1280$ К перколяционный кластер из контактирующих между собой координационных многогранников (0-3-6-0) не образуется. При

охлаждении ниже 1280 К порог перколяции смещается левее штриховой вертикальной линии.

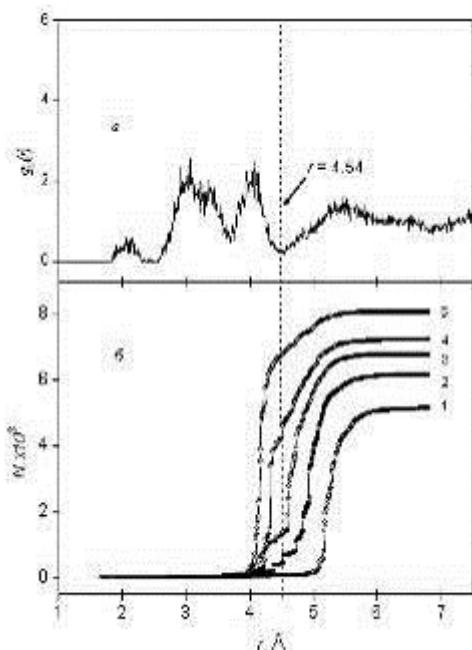


Рисунок 2. Парная функция радиального распределения $g_{II}(r)$ атомов, находящихся в центрах МВ (0-3-6-0) – *a* и число N_I^{\max} таких атомов в наибольшем по размеру кластере с расстояниями между соседями меньшими, либо равными $r - \bar{b}$ (1 – 2300 К, 2 – 1500 К, 3 – 1300 К, 4 – 1200 К, 5 – 0 К)

Таким образом в процессе закалки сплава $\text{Fe}_{83}\text{B}_{17}$ атомы металла образуют вокруг атомов металлоида преимущественную локальную координацию соответствующую МВ (0-3-6-0) Установлено, что вблизи температуры 1300 К из взаимопроникающих и контактирующих между собой координационных многогранников (0-3-6-0) происходит образование перколяционного кластера, что хорошо коррелирует с температурными зависимостями основных термодинамических характеристик модели. Присутствие осей пятого порядка в расположении атомов основных координационных многогранников создает предпосылки для стабилизации аморфной фазы.

Используемые литературные источники:

1. Gaskell P.H. J. Non-Cryst. Solids, 1979, v. 32, №1, p. 207–224.
2. Островский О.И., Григорян В.А., Вишкарев А.Ф. Свойства металлических расплавов. М.: Металлургия, 1988.- 304 с.
3. Евтеев А.В., Косилов А.Т., Кузмищев В.А. Компьютерное моделирование аморфных металлов и сплавов металл-металлоид. Воронеж, Невинномысск: НИЭУП, 2004. – 108с.
4. Евтеев А.В., Косилов А.Т., Левченко Е.В., Прядильщиков А.Ю., ЖЭТФ 2007, 132, 6(12) с 1352-1358.